講義ノート

二時間グリーン函数の理論とその応用（IV）

松　原　武　生（京大理）

§6　母函数の方法

§4，§5にあげた例題中の計算を詳しく追つて見た人ならば，多くのごまかしがなされていることに気づかれるであろう。実際，最後のもつともな結果に到着するまでに，いくつもの迷い道があり，近似を進める程このことはひどくなつて，あいまいさの度合が増してくる。高次のグリーン函数を低次のグリーン函数に分解する"decoupling"の方法に，一般的な原理を見出すことが大変望ましい。この節に述べる二時間グリーン函数の母函数の方法は，面倒な高次グリーン函数のdecoupling を系統化すると共に，グリーン函数の近似法に何らかの原理を見出そうとする一つの試みである。

(1) 簡単なモデル

話をできるだけ明快にするために，単純なモデルについて詳しい議論をする。1箇の電子がエネルギーω_0の準位にあつて，多数の調和振子と接触し，時間的に変動するポテンシアルを感じている場合を考え，電子のエネルギー準位のぼけを問題にする。ハシルトニアンとしては次の形を仮定する：

$$H = \omega_0\ a^{+}a + w\sum_k b_k^{+}b_k + \sum_k f_k\,(b_k + b_k^{+})\,a^{+}a \qquad (6.1)$$

a^{+}, a は電子の演算子，b_k^{+}, b_k は k 番目の振子の演算子で，簡単のためすべての振子は同じ振動数wをもつとしたが，この制限を除くことは容易である。

$$B \equiv \sum_k f_k\,(b_k^{+} + b_k) \qquad (6.2)$$

が時間的に変動する電子に対するポテンシアルであるが，よく知られているよ

うに，そのゆらぎの大きさ（例えば $<B^2>$ で測られる）とゆらぎの速さ（例えば w で測られる）の大小関係によつて

(i) slow modulation ; $w \ll \sqrt{<B^2>}$ ならば ω_0 の周りの巾 $<B^2>$ のガウス分布 (6.3)

(ii) fast modulation ; $w \gg <B^2>$ ならばシャープな ω_0 ー準位

となることが物理的に期待される。この問題をグリーン函数法で解くには

$$G(\omega) = \ll a : a^+ \gg_\omega \tag{6.4}$$

を求めその虚数部分（状態密度）を ω の函数として計算すればよい。（6.1）から運動方程式をつくると，振子系は（6.2）の B の他に

$$C = \sum_k f_k (b_k - b_k^+) \tag{6.5}$$

を用いて完全に記述でき，とじた基礎方程式の組（$\hbar = 1$）

$$\left.\begin{aligned} i\frac{da}{dt} &= (\omega_0 + B)a \\ i\frac{dB}{dt} &= wC \\ i\frac{dC}{dt} &= wB + 2f^2 a^+ a \end{aligned}\right\} \tag{6.6}$$

が得られる。但し

$$f \equiv \sum_k f_k^2 \tag{6.7}$$

従つて $G(\omega)$ に対する方程式は

$$\omega G(\omega) = 1 + \omega_0 G(\omega) + \ll Ba : a^+ \gg$$

である。以下続々と現われる高次のグリーン函数に対して次の記号を用意する。

$$G_{nm}(\omega) = \langle\!\langle C^n B^m a \, : \, a^+ \rangle\!\rangle \qquad (6.8)$$

すると(6.6)を逐次用い $a^2=0$ に注意すると次の形の方程式の鎖がつくられる。

$$\omega G(\omega) = 1 + \omega_0 \; G(\omega) + G_{01}(\omega) \qquad (6.9\,a)$$

$$\omega G_{01}(\omega) = \langle B \rangle + \omega_0 \; G_{01}(\omega) + w G_{10}(\omega) + G_{02}(\omega) \qquad (6.9\,b)$$

$$\omega G_{10}(\omega) = \langle C \rangle + \omega_0 \; G_{10}(\omega) + w G_{01}(\omega) + G_{11}(\omega) \qquad (6.9\,c)$$

$$\omega G_{02}(\omega) = \langle B^2 \rangle + \omega_0 \; G_{02}(\omega) + 2 w G_{11}(\omega) + G_{03}(\omega) \qquad (6.9\,d)$$

$$\omega G_{11}(\omega) = \langle CB \rangle + \omega_0 \; G_{11}(\omega) + w G_{02}(w) + w G_{20}(\omega) + G_{12}(\omega) \qquad (6.9\,e)$$

今まで述べてきたグリーン函数法の処方箋は，方程式の鎖(6.9) をどこかで切断し，残つたグリーン函数の最高次のものを低次のもので近似してとじた方程式系にすることであつた。それに従えば次のような逐次近似が考えられる。

(1°) (6.9 a)で切断：

$$G_{01}(\omega) = \langle B \rangle G(\omega') + g_{01} \simeq \langle B \rangle G(\omega) \qquad (6.10)$$

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega - \omega_0 - \langle B \rangle}$$

(2°) (6.9 b)で切断：

$$G_{10}(\omega) = \langle C \rangle G(\omega) + g_{10} \simeq \langle C \rangle G(\omega) \qquad (6.11)$$

$$G_{02}(\omega) = \langle B^2 \rangle G(\omega) + 2 \langle B \rangle G_{01}(\omega) + g_{02}$$

$$\simeq \langle B^2 \rangle G(\omega) + 2 \langle B \rangle G_{01}(\omega) \qquad (6.12)$$

$$G(\omega) = \cfrac{1}{\omega - \omega_0 - \langle B \rangle - \cfrac{w \langle C \rangle + \langle B^2 \rangle + \langle B \rangle^2}{\omega - \omega_0 - \langle B \rangle}}$$

(3°)　(6.9c)で切断：

$$G_{11}(\omega)=\langle CB\rangle G(\omega)+\langle C\rangle G_{01}(\omega)+\langle B\rangle G_{10}(\omega)+g_{11}(\omega) \tag{6.13}$$

$$G_{02}(\omega)\cong\langle B^2\rangle G(\omega)+2\langle B\rangle G_{01}(\omega)$$

$$G(\omega)=\frac{\begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 \\ \langle B\rangle & \omega-\omega_0-2\langle B\rangle & -w \\ \langle C\rangle & -w-\langle C\rangle & \omega-\omega_0-\langle B\rangle \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \omega-\omega_0 & -1 & 0 \\ -\langle B^2\rangle & \omega-\omega_0-2\langle B\rangle & -w \\ -\langle CB\rangle & -w-\langle C\rangle & \omega-\omega_0-\langle B\rangle \end{vmatrix}}$$

$$=\cfrac{1}{\omega-\omega_0-\langle B\rangle-\cfrac{w\langle C\rangle+\langle B^2\rangle+\langle B\rangle^2+\cfrac{w^2\langle B\rangle+w\langle CB\rangle+w\langle B\rangle\langle C\rangle}{\omega-\omega_0-\langle B\rangle}}{\omega-\omega_0-\langle B\rangle-\cfrac{w^2}{\omega-\omega_0-\langle B\rangle}}}$$

等々………

ここで"decoupling"のしかたとしては，あらゆる可能な分解を考えた。この逐次近似法からわかるように，n番目の方程式で鎖を切断して$G(\omega)$の近似解を求めると

$$G(\omega)=\frac{\omega\text{の}(n-1)\text{次の多項式}}{\omega\text{の}n\text{次の多項式}}$$

の形になり，電子の状態密度は$G(\omega)$の虚数部分をつくつて

$$\lim_{\varepsilon\to 0+}\mathrm{Im}\left[\frac{G(\omega+i\varepsilon)}{\pi}\right]=\sum_{i=1}^{n}\rho_i\,\delta(\omega-\omega_i)\ ;\ \sum_{i=1}^{n}\rho_i=1 \tag{6.14}$$

のように表わされる。すなわちδ－函数の集りが得られる。はじめに注意したように$w \ll \sqrt{<B^2>}$ の極限でガウス分布を得るためには，無限次元まで近似を進めなければならない。換言すると"slow modulation" の場合で力学的なコヘレンスが重要になり，グリーン函数の鎖を途中で切断できない場合には，従来の処方箋は無力である。

(2) 母函数の導入

方程式の鎖(6.9) をすべて考慮しなければならないとすると，この鎖の元になつた運動方程式自身を解かなければならないことは明らかである。グリーン函数のわく内でこれに相当することをやるには，次の母函数を考えるのがよい。二つのパラメーター$\xi\ \eta$を用いて

$$F(\xi\eta\,;\,\omega) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} \frac{\xi^n}{n!}\frac{\eta^m}{m!}\, G_{nm}(\omega) \qquad (6.15)$$

を定義する。 $G(\omega)=G_{00}(\omega)$と約束する。同様に

$$\mathrm{I}(\xi\eta) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} \frac{\xi^n}{n!}\frac{\eta^m}{m!} <C^n B^m> \qquad (6.16)$$

も定義しておく。もし何らかの方法で$F(\xi n : \omega)$がξ，ηの函数として陽に求まれば，$G(\omega)=F(oo:\omega)$によつて$G(\omega)$が求まるわけである。そこで$F(\xi\eta:\omega)$がみたす方程式を見出そう。まず(6.6)を使つて$G_{nm}(\omega)$がみたす方程式を作ると容易に$\omega-\omega_0=x$として

$$xG_{nm}(x) = <C^n B^m> + nw\, G_{n-1\ m+1}(x) + mw\, G_{n+1\ m-1}(x) + G_{n,m+1}(x)$$
$$- f^2 n(n-1)wG_{n-2,m}(x) - f^2 m(m-1)wG_{nm-2}(x) \qquad (6.17)$$

を得る。但し，$[B, C] = -2f^2$の関係を用いた。この両辺に$\xi^n/n!\cdot\eta^m/m!$をかけて，n，mについて和をとると直ちに

$$xF(\xi\eta:x) = \mathrm{I}(\xi,\eta) + w\left\{\xi\frac{\partial}{\partial\eta} + \eta\frac{\partial}{\partial\xi} - f^2(\xi^2+\eta^2)\right\}F(\xi\eta:x) + \frac{\partial}{\partial\eta}F(\xi\eta:x) \qquad (6.18)$$

となる。これが$F(\xi\eta:x)$に対する偏微分方程式である。これは更に簡単にできる。Kubo に従つて cumulant average $<C^nB^m>_c$ を次で導入する：

$$I(\xi,\eta)=\exp\left[\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{\xi^n}{n!}\frac{\eta^m}{m!}<C^nB^m>_c\right]\equiv\exp\left[J(\xi,\eta)\right] \tag{6.19}$$

そして

$$F(\xi\eta:x)=I(\xi\eta)f(\xi\eta:x) \tag{6.20}$$

とおこう。そうすると$f(\xi\eta:x)$に対する方程式は

$$\left[x-w\left(\xi\frac{\partial}{\partial\eta}+\eta\frac{\partial}{\partial\xi}\right)-\frac{\partial}{\partial\eta}+f^2w(\xi^2+\eta^2)-w\left(\xi\frac{\partial J}{\partial\eta}+\eta\frac{\partial J}{\partial\xi}\right)-\frac{\partial J}{\partial\eta}\right]$$
$$\times f(\xi\eta:x)=1 \tag{6.21}$$

の形になる。この方程式の解を議論する前に，$f(\xi\eta:x)$ の意味について少し注意を述べておこう。(6.19)にならつて cumulantグリーン函数 $g_{nm}(x)$ を

$$f(\xi\eta:x)=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\xi^n\eta^m}{n!m!}g_{nm}(x) \tag{6.22}$$

で定義することができるが，(6.22)(6.19)を(6.20)と組合せたものが，グリーン函数の"decoupling"の一つの一般方式を与えている。実際(6.20)の両辺をξ，ηのべきに展開し，係数と比較すれば，先に仮定した(6.10)~(6.13)の形の decoupling がそのまま現われていることが確かめられる。高次の decoupling をこつこつやるのは大変面倒な仕事であるが，この方法によれば全く機械的に decouplingを遂行でき，しかも cumulantグリーン函数に対する方程式は(6.21)をξ，ηのべきに展開することによつて容易に導けるのである。勿論(6.20)の形は決してユニークにきまつたのでなく，むしろ$f(\xi,\eta:x)$に対する方程式が一番簡単な形

になるように選んだものと見るべきである。もしも(6.20)以外の形に選んだとすれば，別の方程式が得られ，それには$<C^n B^m>_c$がもっと複雑に姿を現わしているはずである。微分方程式を厳密に解く限りでは，どのような数学的変換を施しても結果が変るはずがないが，近似計算を途中でやるとなると話がちがつてくる。この点がわれわれの悩みの種であつた。上の議論で暗示される解決策の一つは，$f(\xi\eta : x)$に対する方程式を(6.21)のように最も簡単な形に選び，その方程式に現われたパラメーターの大小に従つて″物理的な近似″を加えて解くことである。他の一つは(6.21)を変分問題にすりかえることであろう。後者についてはまだ十分研究が進んでいない。

ハミルトニアンが(6.1)で与えられる場合，$a^{+}a=1$の空間に限れば，(6.19)の$J(\xi\eta)$を厳密に求めることができる。よく知られたように，調和振子の系は力学量のゆらぎが厳密にガウス分布できまる唯一の例であるから，cumulant averageに2次以上のものが現われるはずがない。実際容易に次の関係を確めることができる。

$$\left.\begin{aligned} &<C>_c=0 \qquad <B>_c=-\frac{2f^2}{w} \\ &<C^2>_c=-2f^2\left(n+\frac{1}{2}\right) \\ &<B^2>_c=2f^2\left(n+\frac{1}{2}\right) \\ &<CB>_c=f^2 \end{aligned}\right\} \qquad (6.23)$$

但し

$$n=\frac{1}{e^{\beta w}-1} \qquad (6.24)$$

従つて

$$J(\xi\eta)=-\frac{2f^2}{w}\eta-f^2\left\{(\xi^2-\eta^2)(n+\frac{1}{2})-\xi\eta\right\} \qquad (6.25)$$

となる。この$J(\xi,\eta)$を(6.21)に用いると$f(\xi\eta:x)$に対する方程式は

$$\left[x-\frac{2f^2}{w}-w(\xi\frac{\partial}{\partial\eta}+\eta\frac{\partial}{\partial\xi})-\frac{\partial}{\partial\eta}+f^2\xi-2f^2(n+\frac{1}{2})\eta\right]f(\xi\eta:x)=1 \qquad (6.26)$$

これは$f(\xi\eta:x)$に対する一階の偏微分方程式であるから，適当な境界条件あるいは初期条件が与えられると解くことができるはずである。

(3) "slow modulation"の極限

(6.26)を一般に解くことは断念して(誰か試みて下さい！)，振子系が十分高温にあり，かつ"slow modulation"の場合

$$n \gg 1$$

$$w^2 \ll 2f^2(n+\frac{1}{2}) \equiv \langle B^2\rangle_c$$

がみたされる場合を考える。以下$x-{}^{2f^2}/_{w}$を改めてxと書いて(6.26)を次の簡単化した方程式ですりかえてしまう：

$$\left[x-\frac{\partial}{\partial\eta}-\langle B^2\rangle_c\,\eta\right]f(\eta:x)=1 \qquad (6.27)$$

この一般解は

$$f(\eta:x)=C\exp\left[\frac{1}{2}\langle B^2\rangle_c\eta^2-x\eta\right]+\exp\left[-\frac{1}{2}\langle B^2\rangle_c\eta^2+x\eta\right]$$

$$\times\int^{\eta}\exp\left(\frac{1}{2}\langle B^2\rangle_c\zeta^2-x\zeta\right)d\zeta \qquad (6.28)$$

であるが，ここで初期条件を与える際，困難にぶつかつてしまう。われわれが欲しいのは

$$f(0:x)=G(x) \qquad (6.29)$$

であるから，(6.29)を初期条件に使うわけにはいかない。

そこでもう一度近似方程式(6.27)の意味を考えて見よう。

$$f(\eta:x)=G(x)+\eta g_1(x)+\frac{1}{2}\eta^2 g_2(x)+\cdots\cdots \qquad (6.30)$$

と展開して(6.27)に入れるとわかるように，われわれは元の方程式の鎖を大胆に近似して

$$\begin{aligned} xG(x) &= 1+g_1(x) \\ xg_1(x) &= \langle B^2\rangle_c G(x)+g_2(x) \\ xg_2(x) &= 2\langle B^2\rangle_c g_1(x)+g_3(x) \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots \\ xg_n(x) &= n\langle B^2\rangle_c g_{n-1}(x)+g_{n+1}(x) \end{aligned} \qquad (6.31)$$

を用いているのである。これは(6.9)で言えば，Cのべきが現われるグリーン函数はすべて省き，wのかかつている項も落した上で，cumulant展開したものである。これを逐次近似で解くと

$$G(x)=\cfrac{1}{x-\cfrac{\langle B^2\rangle_c}{x-\cfrac{2\langle B^2\rangle_c}{x-\cfrac{3\langle B^2\rangle_c}{x\cdots\cdots}}}} \qquad (6.32)$$

が得られる。これは結局誤差函数 Erf(x) で表わされるはずのものである，そこで(6.31) の代りにパラメータ λ を導入した方程式の鎖

$$\begin{aligned} xG(x) &= 1-\frac{1}{\lambda}g_1(x) \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots \\ xg_n(x) &= n\langle B^2\rangle_c g_{n-1}(x)-\frac{1}{\lambda}g_{n+1}(x) \end{aligned} \qquad (6.33)$$

を考える。これは(6.27)の代りに

$$\left[x+\frac{1}{\lambda}\frac{\partial}{\partial\eta}-<B^2>_c\eta\right]f(\eta:x)=1 \qquad (6.34)$$

を採るのと同等である。明らかに $\lambda\to\infty$ の極限で"narrowing limit"

$$G(x)=\frac{1}{x} \qquad f(\eta:x)=\frac{1}{x-<B^2>_c\eta} \qquad (6.35)$$

になるから,(6.34)の一般解の中 $\lambda\to\infty$ の極限で(6.35)の漸近形を持つものを求める。それは

$$f(\eta:x)=\lambda\ \exp\left(-\lambda x\eta+\frac{\lambda}{2}<B^2>_c\eta^2\right)\int_{\infty}^{\eta}\exp\left(-\frac{1}{2}\lambda<B^2>_c\zeta^2+\lambda x\zeta\right)d\zeta$$

$$(6.36)$$

で与えられる。実際(6.36)は方程式(6.34) をみたしているし, $\lambda\to\infty$ の漸近形を調べると

$$f(\eta:x)\to\frac{1}{x-<B^2>_c\eta}\left[1-O\left(\frac{1}{\lambda}\right)\right]$$

となつている。結局求めるグリーン函数 $G(x)$ は(6.36)で $\eta=0$ $\lambda=-1$, $\zeta\to-it$ とおいて

$$G(x)=i\int_0^{\infty}\exp\left(-\frac{1}{2}<B^2>_c t^2+ixt\right)dt \qquad (6.37)$$

となり,予想通り,この虚数部分は $<B^2>_c$ を半値巾にもつガウス分布になる。

ここで考えたモデルは非常に簡単なもので,グリーン函数法によらなくても同様にとけるものである。詳細は省くがハミルトニアンの性質を使うだけで

$$G(\omega)=i\int_0^{\infty}dt\ e^{i(\omega-\omega_0)t}<e^{iH_0t}\cdot e^{-i(H_0+B)t}>_0 \qquad (6.38)$$

の関係を証明することができる。ここで

$$H_0 = \Sigma w\, b_k^+ b_k$$
$$\langle \cdots\cdots \rangle_0 = \mathrm{Tr}\,[\,e^{-\beta(H_0+B)}\cdots]\,/\,\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta(H_0+B)}] \tag{6.39}$$

(6.38)から"slow modulation"の極限で(6.37)を導くことは容易で(6.37)が正しいことを別法で裏づけすることができる。その意味ではグリーン函数法を持出すのは今の場合大げさすぎたが，むしろグリーン函数法が最も無力になると思われる特殊な場合について母函数を使つて解いたのであつて，グリーン函数法のもつ性格の一面を少し明らかにできたと思う。

以上に述べた母函数の方法はもつと一般化することができる。既に二体相互作用をもつフエルミ粒子系のグリーン函数の母函数と，それがみたす方程式を導いてあるが，その有効性の議論とともに詳細は改めて論じたい。